



TITLE:

2バンド電子系の熱力学ポテンシャル

AUTHOR(S):

小野, 正利

CITATION:

小野, 正利. 2バンド電子系の熱力学ポテンシャル. 物性研究 1995, 65(1): 25-41

ISSUE DATE:

1995-10-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/95612>

RIGHT:

2 バンド電子系の熱力学ポテンシャル

北海道医療大 基礎教育 小野正利

(1995 年 7 月 31 日受理)

Abstract

多種類のフェルミ粒子から成る多粒子系の例としてアンダーソンハミルトニアンによって記述できる系を考え、一般的に系の熱力学ポテンシャルはそれぞれの系の熱力学ポテンシャルの和の形に表現できることを示した。この過程で、相互作用定数の従来の方法と違う導入方法が本質的な役割を担っている。この方法は以前に、電子ガスの系に適用して Luttinger et al. [1] の結論を再導出する時に使った方法である。導いた熱力学ポテンシャルからエントロピーと定積熱容量の表式を導き、後者に対してはフェルミ流体の仮定の下に低温での熱容量の表式を導いた。この表式は、摂動展開によるヘビー・フェルミオン系の議論を裏打ちする。

1 はじめに

一種類の粒子から成る多粒子系の熱力学ポテンシャルの表式は、良く知られているように、粒子間の相互作用部分に相互作用定数 λ を掛けることによって、その相互作用定数について恒等的に成り立つ関係式を利用して導くことが出来る [1]。このような恒等関係は、熱力学ポテンシャルを摂動展開によって求める時、それぞれの寄与を表すグラフに含まれる相互作用の数（言い換えると相互作用定数の次数）とグリーン関数の数の間にも存在し、このことを利用した電子ガスの熱力学ポテンシャルの表式は既に Luttinger et al. [2] によって導出されている。Luttinger et al. [2] の方法は、形式的な熱力学関数の表式に止まらず更にそれぞれの系に対する具体的な計算方法として使うことが出来る。しかし、彼らの議論では電子系の化学ポテンシャルを予め与えられたものとして扱うため、求めるべき熱力学ポテンシャルの正しい表式を得るための難しい議論が含まれる。この点を解消するためには、化学ポテンシャル自身も非摂動部分と摂動部分に分け、それに伴い更に相互作用定数の導入方法を変える事が必要になる [3]。即ち、従来の相互作用定数の導入の方法では各グラフに現れる相互作用の数と含まれるグリーン関数の数の間に適切な恒等的関係を見つけることが不可能になる。適切な恒等関係を得るためには、ハミルトニアンの摂動項の全ての生成と消滅の演算子に $\lambda^{\frac{1}{4}}$ を掛けることが必要になる。この方法に

よって、電子ガスの熱力学ポテンシャルに対するLuttinger et al. [2] の結論を自動的に再現することができた[3]。

ここでは、電子ガスに対して使った相互作用定数の導入方法[3]を2種類のフェルミ粒子から成る多粒子系に適用する。このような系のモデルハミルトニアンとして周期アンダーソンハミルトニアンを取り上げこの系の熱力学ポテンシャルの表式を導く。

この系では、ハミルトニアンの相互作用部分に従来のように相互作用定数 λ をそのまま掛けたのでは、Luttinger et al. [2] と同様の議論を繰り返すことが困難であるのは電子ガスの場合以上に明白である。このことを解決する上で、我々が提案した相互作用定数の導入方法[3]が有用となる。即ち、ここでもハミルトニアンの相互作用部分に含まれる全ての粒子の生成と消滅の演算子に $\lambda^{\frac{1}{4}}$ を掛ける。このことによって、熱力学ポテンシャルの摂動計算の各次数を表すグラフに含まれる相互作用の数と、グリーン関数の数の間に、適切な恒等的関係を見つけることができる。これによって電子ガスに対する議論と同様の議論[2, 3]を繰り返すことが可能になる。

一般に相互作用を無視すると、全系の熱力学ポテンシャルの表式は伝導電子の系と局在電子の系とのそれぞれの系の熱力学ポテンシャルの表式の和になる。しかし相互作用があるときにも、同様なことが言えるかどうかは不明である。この点についても、形式的な熱力学ポテンシャルの表式に限れば、我々の取り扱いは、相互作用が有る場合にも、そのことが可能であることを示している。

以下この小論では、2節で系のハミルトニアンと相互作用定数を導入し、3節でグリーン関数とその運動方程式を導く。4節で2, 3の各節で定義した関数を使って熱力学ポテンシャルの形式的表式を導く。この部分では、我々の相互作用定数の導入が非常にうまく機能しているのを見ることが出来る。5節では、熱力学ポテンシャルの摂動計算においてグラフ計算の手続きを示し、各グラフに含まれる相互作用部分とグリーン関数の数の間の恒等的な関係を導く。更に、このことを利用して4節で導いた熱力学ポテンシャルの表式を再導出し、3節で導いたグリーン関数の自己エネルギーに対する議論を行った後に計算に便利な熱力学ポテンシャルの表式を導く。この表式は、Ohkawa[4]がフェルミ流体を仮定して書き下している表式を再現する。6節でエントロピーと定積熱容量の表式を導き、更にフェルミ流体を仮定して低温での定積熱容量を導く。最後に7節で小論のまとめと議論を行う。

2 系のハミルトニアンと相互作用定数の導入

以下、演算子 a と f はそれぞれ伝導電子及び f 電子を表す。外部磁場が無い場合を考えることとし、周期アンダーソンモデルのハミルトニアンを次のように与える。

$$H = \sum_{k\sigma} \varepsilon_k a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} + \sum_{k\sigma} E_k f_{k\sigma}^+ f_{k\sigma} + \sum_{k\sigma} (V_k a_{k\sigma}^+ f_{k\sigma} + V_k^* f_{k\sigma}^+ a_{k\sigma}) + \frac{1}{2} \frac{U}{N_0} \sum_{k_1} \sum_{k_2} \sum_{q \neq 0\sigma} f_{k_1\sigma}^+ f_{k_2-\sigma}^+ f_{k_2-q-\sigma} f_{k_1+q\sigma} \quad (1)$$

ここで、 N_0 は構成原子の数である。次に (1) 式のハミルトニアン H から粒子数演算子 N と化学ポテンシャル μ を使って次の様に演算子 K を定義する。

$$K = H - \mu N = K_0 + K_1 \quad (2)$$

ここで、 $N = \sum_{k\sigma} a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} + \sum_{k\sigma} f_{k\sigma}^+ f_{k\sigma}$ である。

以後、(2) 式を系のハミルトニアンと呼ぶ。この式の 2 番目の等号によってハミルトニアン K を非摂動部分 K_0 と摂動部分 K_1 に分けてある。これらは相互作用の無いときの化学ポテンシャル μ_0 , 及び $\Delta\mu = \mu - \mu_0$ を使うことにより次のように与えられる。

$$K_0 = \sum_{k\sigma} (\varepsilon_k - \mu_0) a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} + \sum_{k\sigma} (E_k - \mu_0) f_{k\sigma}^+ f_{k\sigma} \quad (3a)$$

$$K_1 = \sum_{k\sigma} (-\Delta\mu) a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} + \sum_{k\sigma} (-\Delta\mu) f_{k\sigma}^+ f_{k\sigma} + \sum_{k\sigma} \{V_k a_{k\sigma}^+ f_{k\sigma} + V_k^* f_{k\sigma}^+ a_{k\sigma}\} + \frac{1}{2} \frac{U}{N_0} \sum_{k_1} \sum_{k_2} \sum_{q \neq 0\sigma} f_{k_1\sigma}^+ f_{k_2-\sigma}^+ f_{k_2-q-\sigma} f_{k_1+q\sigma} \quad (3b)$$

ここで、(3b) 式に相互作用定数 λ を我々の方法で導入する[3]。それには、単純に全ての生成及び消滅の演算子にそれぞれ $\lambda^{\frac{1}{4}}$ を掛けるとよい。その結果 (3b) 式には次のように相互作用定数が含まれる。

$$K_1 = \sqrt{\lambda} \sum_{k\sigma} (-\Delta\mu) a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} + \sqrt{\lambda} \sum_{k\sigma} (-\Delta\mu) f_{k\sigma}^+ f_{k\sigma} + \sqrt{\lambda} \sum_{k\sigma} \{V_k a_{k\sigma}^+ f_{k\sigma} + V_k^* f_{k\sigma}^+ a_{k\sigma}\} \\ + \frac{1}{2} \lambda \frac{U}{N_0} \sum_{k_1} \sum_{k_2} \sum_{q \neq 0\sigma} f_{k_1\sigma}^+ f_{k_2-\sigma}^+ f_{k_2-q-\sigma} f_{k_1+q\sigma} \quad (4)$$

3 グリーン関数とその運動方程式

以下のようににグリーン関数とそのフーリエ変換を定義する。

$$G_{k\sigma}^a(u_1, u_2) = -\langle TA_{k\sigma}(u_1) A_{k\sigma}^+(u_2) \rangle = \frac{1}{\beta} \sum_l G_{k\sigma}^a(i\omega_l) \exp(-i\omega_l(u_1 - u_2)) \quad (5a)$$

$$G_{k\sigma}^f(u_1, u_2) = -\langle TF_{k\sigma}(u_1) F_{k\sigma}^+(u_2) \rangle = \frac{1}{\beta} \sum_l G_{k\sigma}^f(i\omega_l) \exp(-i\omega_l(u_1 - u_2)) \quad (5b)$$

$$G_{k\sigma}^{af}(u_1, u_2) = -\langle TA_{k\sigma}(u_1) F_{k\sigma}^+(u_2) \rangle = \frac{1}{\beta} \sum_l G_{k\sigma}^{af}(i\omega_l) \exp(-i\omega_l(u_1 - u_2)) \quad (5c)$$

$$G_{k\sigma}^{fa}(u_1, u_2) = -\langle TF_{k\sigma}(u_1) A_{k\sigma}^+(u_2) \rangle = \frac{1}{\beta} \sum_l G_{k\sigma}^{fa}(i\omega_l) \exp(-i\omega_l(u_1 - u_2)) \quad (5d)$$

ここで, $A_{k\sigma}(u) = e^{uK} a_{k\sigma} e^{-uK}$, $F_{k\sigma}(u) = e^{uK} f_{k\sigma} e^{-uK}$ であり, また X を任意の演算子とすると
 $\langle X \rangle = \text{Tr}\{\exp(-\beta K) X\} / \text{Tr}\{\exp(-\beta K)\}$ である。なお m を整数として $\omega_m = \pi(2m+1)/\beta$ であり, k_B をボルツマン定数, T を熱力学的温度とすると $1/\beta = k_B T$ である。次にこれらのグリーン関数の運動方程式は次のようになる。

$$-\frac{\partial G_{k\sigma}^a(u_1, u_2)}{\partial u_1} = (\varepsilon_k - \mu_0) G_{k\sigma}^a(u_1, u_2) + \sqrt{\lambda} (-\Delta\mu) G_{k\sigma}^a(u_1, u_2) \\ + \sqrt{\lambda} V_k G_{k\sigma}^{fa}(u_1, u_2) + \delta(u_1 - u_2) \quad (6a)$$

$$-\frac{\partial G_{k\sigma}^{af}(u_1, u_2)}{\partial u_1} = (\varepsilon_k - \mu_0) G_{k\sigma}^{af}(u_1, u_2) + \sqrt{\lambda} (-\Delta\mu) G_{k\sigma}^{af}(u_1, u_2) \\ + \sqrt{\lambda} V_k G_{k\sigma}^f(u_1, u_2) \quad (6b)$$

$$-\frac{\partial G_{k\sigma}^{fa}(u_1, u_2)}{\partial u_1} = (\varepsilon_k - \mu_0) G_{k\sigma}^{fa}(u_1, u_2) + \sqrt{\lambda} (-\Delta\mu) G_{k\sigma}^{fa}(u_1, u_2) + \sqrt{\lambda} V_k^* G_{k\sigma}^a(u_1, u_2) \\ - \lambda \frac{U}{N_0} \sum_{k_1} \sum_{q \neq 0} \langle TF_{k_1-\sigma}^+(u_1) F_{k_1+q-\sigma}(u_1) F_{k-q\sigma}(u_1) A_{k\sigma}^+(u_2) \rangle \quad (6c)$$

$$-\frac{\partial G_{k\sigma}^f(u_1, u_2)}{\partial u_1} = (\varepsilon_k - \mu_0) G_{k\sigma}^f(u_1, u_2) + \sqrt{\lambda} (-\Delta\mu) G_{k\sigma}^f(u_1, u_2) + \sqrt{\lambda} V_k^* G_{k\sigma}^{af}(u_1, u_2) \\ - \lambda \frac{U}{N_0} \sum_{k_1} \sum_{q \neq 0} \langle TF_{k_1-\sigma}^+(u_1) F_{k_1+q-\sigma}(u_1) F_{k-q\sigma}(u_1) F_{k\sigma}^+(u_2) \rangle + \delta(u_1 - u_2) \quad (6d)$$

以後は、グリーン関数のフーリエ変換を使って議論を展開していくので、これらの運動方程式を次のように書き直す。

$$i\omega_l G_{k\sigma}^a(i\omega_l) = (\varepsilon_k - \mu_0) G_{k\sigma}^a(i\omega_l) + \sqrt{\lambda}(-\Delta\mu) G_{k\sigma}^a(i\omega_l) + \sqrt{\lambda} V_k G_{k\sigma}^{fa}(i\omega_l) + 1, \quad (7a)$$

$$i\omega_l G_{k\sigma}^{af}(i\omega_l) = (\varepsilon_k - \mu_0) G_{k\sigma}^{af}(i\omega_l) + \sqrt{\lambda}(-\Delta\mu) G_{k\sigma}^{af}(i\omega_l) + \sqrt{\lambda} V_k G_{k\sigma}^f(i\omega_l), \quad (7b)$$

$$i\omega_l G_{k\sigma}^{fa}(i\omega_l) = (E_k - \mu_0) G_{k\sigma}^{fa}(i\omega_l) + \sqrt{\lambda}(-\Delta\mu) G_{k\sigma}^{fa}(i\omega_l) + \sqrt{\lambda} V_k^* G_{k\sigma}^a(i\omega_l) + \lambda \Pi_{k\sigma}^{(1)}(i\omega_l) G_{k\sigma}^{fa}(i\omega_l), \quad (7c)$$

$$i\omega_l G_{k\sigma}^f(i\omega_l) = (E_k - \mu_0) G_{k\sigma}^f(i\omega_l) + \sqrt{\lambda}(-\Delta\mu) G_{k\sigma}^f(i\omega_l) + \sqrt{\lambda} V_k^* G_{k\sigma}^{af}(i\omega_l) + \lambda \Pi_{k\sigma}^{(2)}(i\omega_l) G_{k\sigma}^f(i\omega_l) + 1. \quad (7d)$$

これらの表式の中で (7c) 式に現れる $\Pi_{k\sigma}^{(1)}(i\omega_l)$ と (7d) 式に現れる $\Pi_{k\sigma}^{(2)}(i\omega_l)$ は次のように定義してある。

$$\begin{aligned} -\lambda U \sum_{k_1 q \neq 0} \langle T F_{k_1 - \sigma}^+(u_1) F_{k_1 + q - \sigma}(u_1) F_{k - q \sigma}(u_1) A_{k\sigma}^+(u_2) \rangle &= \lambda \int_0^\beta \Pi_{k\sigma}^{(1)}(u_1, u') G_{k\sigma}^{fa}(u', u_2) du' \\ &= \lambda \frac{1}{\beta} \sum_m \Pi_{k\sigma}^{(1)}(i\omega_m) G_{k\sigma}^{fa}(i\omega_m) \exp(-i\omega_m(u_1 - u_2)) \end{aligned} \quad (8a)$$

$$\begin{aligned} -\lambda U \sum_{k_1 q \neq 0} \langle T F_{k_1 - \sigma}^+(u_1) F_{k_1 + q - \sigma}(u_1) F_{k - q \sigma}(u_1) F_{k\sigma}^+(u_2) \rangle &= \lambda \int_0^\beta \Pi_{k\sigma}^{(2)}(u_1, u') G_{k\sigma}^f(u', u_2) du' \\ &= \lambda \frac{1}{\beta} \sum_m \Pi_{k\sigma}^{(2)}(i\omega_m) G_{k\sigma}^f(i\omega_m) \exp(-i\omega_m(u_1 - u_2)) \end{aligned} \quad (8b)$$

尚、ここでは更に次のフーリエ変換が可能であることを仮定している。

$$\Pi_{k\sigma}^{(1) \text{ or } (2)}(u_1, u_2) = \frac{1}{\beta} \sum_m \Pi_{k\sigma}^{(1) \text{ or } (2)}(i\omega_m) \exp(-i\omega_m(u_1 - u_2)) \quad (9)$$

次に、対角グリーン関数のみが我々の求める熱力学ポテンシャルの表式に現れるので、これらの表式を (7) 式から導く。結果は次のようである。

$$\begin{aligned} G_{k\sigma}^a(i\omega) &= \frac{G_{k\sigma}^{0a}(i\omega)}{1 - G_{k\sigma}^{0a}(i\omega) \lambda |V_k|^2 G_{k\sigma}^{0f1}(i\omega)} = \frac{1}{(G_{k\sigma}^{0a}(i\omega))^{-1} - \lambda |V_k|^2 G_{k\sigma}^{0f1}(i\omega)} \\ &= \frac{1}{i\omega - (\varepsilon_k - \mu_0) - \Delta_{k\sigma}^a(i\omega)} \end{aligned} \quad (10a)$$

$$G_{k\sigma}^f(i\omega) = \frac{G_{k\sigma}^{0f2}(i\omega)}{1 - G_{k\sigma}^{0f2}(i\omega)\lambda|V_k|^2 G_{k\sigma}^{0a}(i\omega)} = \frac{1}{(G_{k\sigma}^{0f2}(i\omega))^{-1} - \lambda|V_k|^2 G_{k\sigma}^{0a}(i\omega)}$$

$$= \frac{1}{i\omega - (E_k - \mu_0) - \Delta_{k\sigma}^f(i\omega)} \quad (10b)$$

ここで、 $\Delta_{k\sigma}^a(i\omega)$ と $\Delta_{k\sigma}^f(i\omega)$ とはそれぞれのグリーン関数の自己エネルギーであり、

(10a) 式と (10b) 式によって次のように定義されている。

$$\Delta_{k\sigma}^a(i\omega) = \sqrt{\lambda}(-\Delta\mu) + \lambda|V_k|^2 G_{k\sigma}^{0f1}(i\omega) \quad (11a)$$

$$\Delta_{k\sigma}^f(i\omega) = \sqrt{\lambda}(-\Delta\mu) + \lambda|V_k|^2 G_{k\sigma}^{0a}(i\omega) + \lambda\Pi_{k\sigma}^{(2)}(i\omega) \quad (11b)$$

ここで、 $G_{k\sigma}^{0a}(i\omega)$ 、 $G_{k\sigma}^{0f1}(i\omega)$ 、そして $G_{k\sigma}^{0f2}(i\omega)$ は次の様に与えられる。

$$G_{k\sigma}^{0a}(i\omega) = \frac{1}{i\omega - (\varepsilon_k - \mu_0) - \sqrt{\lambda}(-\Delta\mu)} \quad (12a)$$

$$G_{k\sigma}^{0f1}(i\omega) = \frac{1}{i\omega - (E_k - \mu_0) - \sqrt{\lambda}(-\Delta\mu) - \lambda\Pi_{k\sigma}^{(1)}(i\omega)} \quad (12b)$$

$$G_{k\sigma}^{0f2}(i\omega) = \frac{1}{i\omega - (E_k - \mu_0) - \sqrt{\lambda}(-\Delta\mu) - \lambda\Pi_{k\sigma}^{(2)}(i\omega)} \quad (12c)$$

以上の式では次の事柄が検討を要する。まず、 $\Pi_{k\sigma}^{(1)}(i\omega)$ と $\Pi_{k\sigma}^{(2)}(i\omega)$ を (9) 式のように定義する事の妥当性についてであり、更に、これらは同じものであるのを推定することができるが、その事を示すことである。当座、これらのことは後に回して (10) 式の対角グリーン関数を使った熱力学ポテンシャルの表式を次に導く。

4 熱力学関数の表式

熱力学ポテンシャル Ω は分配関数 Z を使って次の式で表される。

$$\Omega = -\frac{1}{\beta} \ln Z = -\frac{1}{\beta} \ln \text{Tr}(\exp(-\beta K)) \quad (13)$$

ここで、この式を λ で微分する。

$$\frac{\partial \Omega}{\partial \lambda} = -\frac{1}{\beta} \frac{\text{Tr}\left(\exp(-\beta K)(-\beta) \frac{\partial K}{\partial \lambda}\right)}{\text{Tr}(\exp(-\beta K))} = \frac{\text{Tr}\left(\exp(-\beta K) \frac{\partial K}{\partial \lambda}\right)}{\text{Tr}(\exp(-\beta K))} \quad (14a)$$

ここで、

$$\lambda \frac{\partial K}{\partial \lambda} = \frac{1}{2} \sqrt{\lambda} \sum_{k\sigma} (-\Delta\mu) a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} + \frac{1}{2} \sqrt{\lambda} \sum_{k\sigma} (-\Delta\mu) f_{k\sigma}^+ f_{k\sigma} + \frac{1}{2} \sqrt{\lambda} \sum_{k\sigma} \{V_k a_{k\sigma}^+ f_{k\sigma} + V_k^* f_{k\sigma}^+ a_{k\sigma}\} \\ + \frac{1}{2} \lambda \frac{U}{N_0} \sum_{k_1} \sum_{k_2} \sum_{q \neq 0\sigma} f_{k_1\sigma}^+ f_{k_2-\sigma}^+ f_{k_2-q-\sigma} f_{k_1+q\sigma} \quad (14b)$$

(14a) 式は (14b) 式を代入して次のように書き直して行くことができる。

$$\lambda \frac{\partial \Omega}{\partial \lambda} = \frac{1}{2} \sqrt{\lambda} \sum_{k\sigma} (-\Delta\mu) G_{k\sigma}^a(\beta, \beta + 0^+) + \frac{1}{2} \sqrt{\lambda} \sum_{k\sigma} (-\Delta\mu) G_{k\sigma}^f(\beta, \beta + 0^+) \\ + \frac{1}{2} \sqrt{\lambda} \sum_{k\sigma} \{V_k G_{k\sigma}^{fa}(\beta, \beta + 0^+) + V_k^* G_{k\sigma}^{af}(\beta, \beta + 0^+)\} + \frac{1}{2} \lambda \sum_{k\sigma} \int_0^\beta \Pi_{k\sigma}^{(2)}(\beta, u') G_{k\sigma}^f(u', \beta + 0^+) du' \\ = \frac{1}{2\beta} \sqrt{\lambda} \sum_{k\sigma} \sum_l (-\Delta\mu) G_{k\sigma}^a(i\omega_l) e^{i\omega_l 0^+} + \frac{1}{2\beta} \sqrt{\lambda} \sum_{k\sigma} \sum_l (-\Delta\mu) G_{k\sigma}^f(i\omega_l) e^{i\omega_l 0^+} \\ + \frac{1}{2\beta} \sqrt{\lambda} \sum_{k\sigma} \sum_l \{V_k G_{k\sigma}^{fa}(i\omega_l) + V_k^* G_{k\sigma}^{af}(i\omega_l)\} e^{i\omega_l 0^+} + \frac{1}{2\beta} \lambda \sum_{k\sigma} \sum_l \Pi_{k\sigma}^{(2)}(i\omega_l) G_{k\sigma}^f(i\omega_l) e^{i\omega_l 0^+} \quad (15a)$$

(15a) 式の最初の等号の右辺に現れる表式の中の 0^+ は正の無限小数を意味する。

(15a) 式の2番目の等号の第3項は (7a), (7b), (7c), (7d) の各式を使って次のように書き換えることができる。

$$\frac{1}{2\beta} \sqrt{\lambda} \sum_{k\sigma} \sum_l \{V_k G_{k\sigma}^{fa}(i\omega_l) + V_k^* G_{k\sigma}^{af}(i\omega_l)\} e^{i\omega_l 0^+} \\ = \frac{1}{2\beta} \sqrt{\lambda} \sum_{k\sigma} \sum_l \{V_k G_{k\sigma}^{0f1}(i\omega_l) \sqrt{\lambda} V_k^* G_{k\sigma}^a(i\omega_l) + V_k^* G_{k\sigma}^{0a}(i\omega_l) \sqrt{\lambda} V_k G_{k\sigma}^f(i\omega_l)\} e^{i\omega_l 0^+} \\ = \frac{1}{2\beta} \sum_{k\sigma} \sum_l \left\{ \lambda |V_k|^2 G_{k\sigma}^{0f1}(i\omega_l) G_{k\sigma}^a(i\omega_l) + \lambda |V_k|^2 G_{k\sigma}^{0a}(i\omega_l) G_{k\sigma}^f(i\omega_l) \right\} e^{i\omega_l 0^+} \quad (15b)$$

従って, (15a) 式は (11a) 式と (11b) 式を使って次のようになる。

$$\lambda \frac{\partial \Omega}{\partial \lambda} = \frac{1}{2\beta} \sum_{k\sigma} \sum_l \Delta_{k\sigma}^a(i\omega) G_{k\sigma}^a(i\omega) e^{i\omega_l 0^+} + \frac{1}{2\beta} \sum_{k\sigma} \sum_l \Delta_{k\sigma}^f(i\omega) G_{k\sigma}^f(i\omega) e^{i\omega_l 0^+} \quad (16)$$

最後に (16) 式の両辺の λ を λ' と書き直してから両辺を λ' で割って更に 0 から λ ままで積分すると, 次の表式を導くことができる。

$$\Omega(\lambda) = \Omega(0) + \frac{1}{2\beta} \sum_{k\sigma} \sum_l \int_0^\lambda \frac{d\lambda'}{\lambda'} \Delta_{k\sigma}^a(i\omega_l) G_{k\sigma}^a(i\omega_l) e^{i\omega_l 0^+} \\ + \frac{1}{2\beta} \sum_{k\sigma} \sum_l \int_0^\lambda \frac{d\lambda'}{\lambda'} \Delta_{k\sigma}^f(i\omega_l) G_{k\sigma}^f(i\omega_l) e^{i\omega_l 0^+} \quad (17)$$

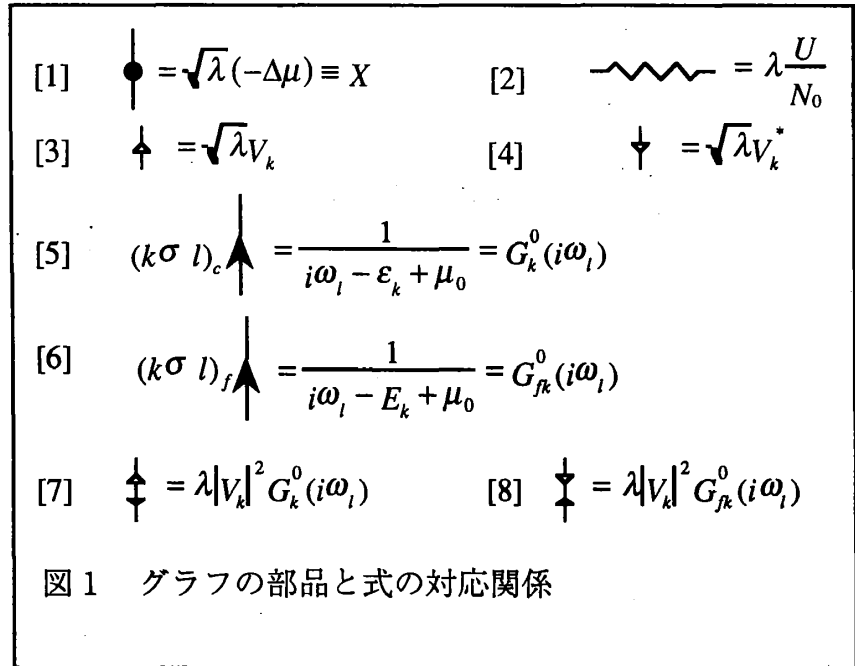
この表式で、 λ を 1 とした $\Omega(1)$ が求める熱力学ポテンシャルである。その時、形式的に、右辺第 2 項が伝導電子系の熱力学ポテンシャルに属する部分、第 3 項が f 電子系の熱力学ポテンシャルに属する部分であると考えることが出来る。 λ を 0 とした $\Omega(0)$ は相互作用が無いときの熱力学ポテンシャルである。

以上で、目的とする熱力学ポテンシャルの形式的表式を得ることが出来た。次の節でグラフ計算の規則に基づいてこの表式を再度導出し、計算に便利な形に変形する。

5 熱力学ポテンシャルのグラフ計算

熱力学ポテンシャルの摂動計算は、先ず摂動の各次数毎に対応するグラフを全て集めたうで、それらの計算

の表式を作る。この時、各グラフの計算の表式は考えている系ごとに規則を見つけることによって容易に得られる。(2) 式のハミルトニアンの場合の規則を次に書く。先ずグラフを構成する部分(部品)とそれが表す式の対応関係を図 1 に示す。各グラフの λ 依存性を知



るために各部品にはそれ

をつけてある。なお、 λ の次数と摂動展開の次数とは一般に異なる。図 1 にある部品とそれに対応する式を使うと求める規則は以下の通りとなる。

〔1〕可能な n 次の "つながった" グラフを書く。各グラフの次数は部品の次数の合計である。各部品の次数は次の通りである：[1], [2], [3], [4] は 1 次の部品。また, [7], [8] は 2 次の部品として扱う。

〔2〕 n 次のグラフには次の因子をつける。

$$-\frac{1}{\beta} \left(\frac{-1}{2\beta} \right)^{n-m_{cf}} \frac{1}{n!} (-1)^{n_1} (-\Delta\mu)^m \left(\lambda \frac{U}{N_0} \right)^{n-m-m_d} \binom{m_{cf}}{m_d/2} \frac{n!}{m_w! m_c! m_f! m_{cf}!} \quad .$$

ここで、 m は[1]の数、 n_l は電子線の閉じた環の数、 m_{cf} は[3]と[4]の合計数、 m_w は[2]の数を表す。また m_c と m_f についてはこれらの和が m となるが、(3b) 式の右辺第1項からの寄与である[1]の数を m_c 、また (3b) 式の右辺第2項からの寄与である[1]の数を m_f としてある。

[3] 伝導電子の各線にラベル $(k\sigma)_c$ をつけグリーン関数[5]を対応させる。また f 電子の各線にはラベル $(k\sigma)_f$ をつけグリーン関数[6]を対応させる。部品[1]を出入りするグリーン関数は同じラベルとする。そして、部品[3]、[4]、[7]、[8]を出入りするグリーン関数は、 k と σ 及び $i\omega_l$ が同じであり、これらの部品自身も同じ k をもつ。

[4] 独立な $i\omega_l$ の数については "保存則" を適用する。すなわち、1つの相互作用に入ってくるグリーン関数の持つ $i\omega_l$ の和は、そこから出ていくグリーン関数の持つ $i\omega_l$ の和に等しい。一般に n 次のグラフには独立な $i\omega_l$ の数が $n - m - m_{cf} + 1$ 個ある。

[5] 同じ相互作用を出入りする1本の "線 (グリーン関数)" については伝導電子か f 電子かによって次のもののどちらかを対応させる。

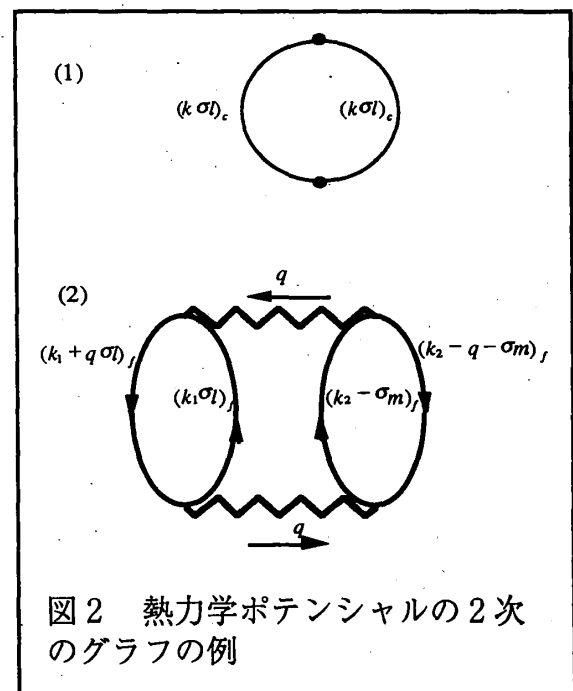
$$G_k^0(i\omega_l)e^{i\omega_l 0^+} \quad \text{or} \quad G_{fk}^0(i\omega_l)e^{i\omega_l 0^+}$$

[6] $(k\sigma)$ に渡る和を取る。

[7] それぞれのグラフにその重みを掛ける。

熱力学ポテンシャルの2次のグラフの例を図2に示した。これらのグラフのそれぞれの計算の表式は以上の規則を使うと次のようになる。グラフ(1)に対しては、

$$\text{図2の (1)} = \frac{1}{2}(X)^2 \sum_{k\sigma} \frac{1}{\beta} \sum_l (G_k^0(i\omega_l))^2 \quad .$$



グラフ (2) に対しては,

$$\text{図 2 の (2)} = -\frac{1}{\beta} \frac{1}{4} \left(\lambda \frac{U}{N_0} \right)^2 \sum_{k_1 k_2 q \sigma} \frac{1}{\beta^2} \sum_{lm} G_{fk_1}^0(i\omega_l) G_{fk_1+q}^0(i\omega_l) G_{fk_2}^0(i\omega_m) G_{fk_2-q}^0(i\omega_m) .$$

さて, 寄与する全てのグラフからの表式が求められたとすると, 熱力学ポテンシャルは, それらの和として次のような表式を持つ。

$$\Omega(\lambda) = \Omega(0) + \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m+m_{cf}=0}^n \Omega(\lambda; n, m_c, m_f, m_{cf}) \quad (18)$$

ここで, $\Omega(\lambda; n, m_c, m_f, m_{cf})$ は n 次のグラフの中で, 図 1 の部品をそれぞれ, m_w 個, m_c 個, m_f 個, m_{cf} 個持ったものの和を表している。それらグラフに含まれる部品の合計が n になっていて, 相互作用定数 λ の次数は $\frac{1}{2}(2n - m - m_{cf})$ である。この次数は, グラフに含まれるグリーン関数 $G_k^0(i\omega)$ の数を n_c^G 個, グリーン関数 $G_{fk}^0(i\omega)$ の数を n_f^G 個とすると, $\frac{1}{2}(n_c^G + n_f^G)$ とも書くことが出来る。尚, n_c^G と n_f^G はそれぞれ, $n_c^G = m_c + \frac{1}{2}m_{cf}$ 及び $n_f^G = 2m_w + m_f + \frac{1}{2}m_{cf}$ と表すことが出来る。また, $n_c^G + n_f^G = n + m_w$ とも書くことが出来る。これらのことを考慮すると, $\Omega(\lambda; n, m_c, m_f, m_{cf})$ は次のようになる。

$$\Omega(\lambda; n, m_c, m_f, m_{cf}) = \frac{1}{2n - m_c - m_f - m_{cf}} \times \left(\frac{1}{\beta} \sum_{k\sigma} \sum_l G_k^0(i\omega_l) \Delta'_{k\sigma}(i\omega_l, n, m_c, m_f, m_{cf}, \lambda) + \frac{1}{\beta} \sum_{k\sigma} \sum_l G_{fk}^0(i\omega_l) \Delta'_{fk\sigma}(i\omega_l, n, m_c, m_f, m_{cf}, \lambda) \right) \quad (19)$$

この式で $\Delta'_{k\sigma}(i\omega_l, n, m_c, m_f, m_{cf}, \lambda)$ 及び $\Delta'_{fk\sigma}(i\omega_l, n, m_c, m_f, m_{cf}, \lambda)$ は, 可能な全ての自己エネルギー (プロパー及びインプロパー自己エネルギーの両方) の和である。即ち, n , m_c , m_f そして m_{cf} で指定される全てのグラフにおいて, 前者は電子線のグリーン関数 $G_k^0(i\omega_l)$ を一つ除いたものの全ての和であり, 後者は電子線のグリーン関数 $G_{fk}^0(i\omega_l)$ を一つ除いたものの全ての和である。さて, 恒等式

$$\frac{1}{2n - m - m_{cf}} (\sqrt{\lambda})^{2n - m - m_{cf}} = \frac{1}{2} \int_0^{\lambda} \frac{(\sqrt{\lambda'})^{2n - m - m_{cf}}}{\lambda'} d\lambda' \quad , \quad (20)$$

を (19) 式に使った後 (18) 式に代入すると、熱力学ポテンシャルを次のように書き直して行く事が出来る。

$$\Omega(\lambda) - \Omega(0) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m+m_f=0}^n \frac{1}{\beta} \sum_{k\sigma} \sum_l \frac{1}{2} \int_0^\lambda G_k^0(i\omega_l) \Delta'_{k\sigma}(i\omega_l, n, m_c, m_f, m_{cf}, \lambda') \frac{d\lambda'}{\lambda'} \\ + \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m+m_f=0}^n \frac{1}{\beta} \sum_{k\sigma} \sum_l \frac{1}{2} \int_0^\lambda G_{fk}^0(i\omega_l) \Delta'_{fk\sigma}(i\omega_l, n, m_c, m_f, m_{cf}, \lambda') \frac{d\lambda'}{\lambda'} \quad , \quad (21a)$$

$$= \frac{1}{\beta} \sum_{k\sigma} \sum_l \frac{1}{2} \int_0^\lambda G_k^0(i\omega_l) \Delta'_{k\sigma}(i\omega_l, \lambda') \frac{d\lambda'}{\lambda'} + \frac{1}{\beta} \sum_{k\sigma} \sum_l \frac{1}{2} \int_0^\lambda G_{fk}^0(i\omega_l) \Delta'_{fk\sigma}(i\omega_l, \lambda') \frac{d\lambda'}{\lambda'} \quad , \quad (21b)$$

$$= \frac{1}{2\beta} \sum_{k\sigma} \sum_l \int_0^\lambda G_k^0(i\omega_l) (\Delta_{k\sigma}^a(i\omega_l) + \Delta_{k\sigma}^a(i\omega_l) G_k^0(i\omega_l) \Delta_{k\sigma}^a(i\omega_l) + \dots) \frac{d\lambda'}{\lambda'} \\ + \frac{1}{2\beta} \sum_{k\sigma} \sum_l \int_0^\lambda G_{fk}^0(i\omega_l) (\Delta_{k\sigma}^f(i\omega_l) + \Delta_{k\sigma}^f(i\omega_l) G_{fk}^0(i\omega_l) \Delta_{k\sigma}^f(i\omega_l) + \dots) \frac{d\lambda'}{\lambda'} \quad , \quad (21c)$$

$$= \frac{1}{2\beta} \sum_{k\sigma} \sum_l \int_0^\lambda (G_k^0(i\omega_l) + G_k^0(i\omega_l) \Delta_{k\sigma}^a(i\omega_l) G_k^0(i\omega_l) + \dots) \Delta_{k\sigma}^a(i\omega_l) \frac{d\lambda'}{\lambda'} \\ + \frac{1}{2\beta} \sum_{k\sigma} \sum_l \int_0^\lambda (G_{fk}^0(i\omega_l) + G_{fk}^0(i\omega_l) \Delta_{k\sigma}^f(i\omega_l) G_{fk}^0(i\omega_l) + \dots) \Delta_{k\sigma}^f(i\omega_l) \frac{d\lambda'}{\lambda'} \quad , \quad (21d)$$

$$= \frac{1}{2\beta} \sum_{k\sigma} \sum_l \int_0^\lambda G_{k\sigma}^a(i\omega_l) \Delta_{k\sigma}^a(i\omega_l) \frac{d\lambda'}{\lambda'} + \frac{1}{2\beta} \sum_{k\sigma} \sum_l \int_0^\lambda G_{k\sigma}^f(i\omega_l) \Delta_{k\sigma}^f(i\omega_l) \frac{d\lambda'}{\lambda'} \quad . \quad (21e)$$

ここで、(21b) 式の $\Delta'_{k\sigma}(i\omega_l, \lambda')$ と $\Delta'_{fk\sigma}(i\omega_l, \lambda')$ は (21a) 式の全ての次数のプロパーとインプロパー自己エネルギーの和をとったものである。これらは (21c) のように、それぞれのプロパー自己エネルギー $\Delta_{k\sigma}^a(i\omega_l)$ と $\Delta_{k\sigma}^f(i\omega_l)$ を使って書くことが出来る。さて (21d) 式のように書き換えることによって (21e) 式を得るが、この (21e) 式は (17) 式そのものである。この式は、熱力学ポテンシャルのグラフ計算に基づくものであり、各グラフに含まれる部品の数から導かれる相互作用定数の次数とグリーン関数の数に関する考察に基づく結果であった。ここではこの事を利用して、もう少し熱力学ポテンシャルの表式を検討していく。そのため (21e) 式を λ で微分する。

$$\frac{\partial \Omega(\lambda)}{\partial \lambda} = \frac{1}{2\beta} \sum_{k\sigma} \sum_l G_{k\sigma}^a(i\omega_l) \Delta_{k\sigma}^a(i\omega_l) \frac{1}{\lambda} + \frac{1}{2\beta} \sum_{k\sigma} \sum_l G_{k\sigma}^f(i\omega_l) \Delta_{k\sigma}^f(i\omega_l) \frac{1}{\lambda} \quad , \quad (22a)$$

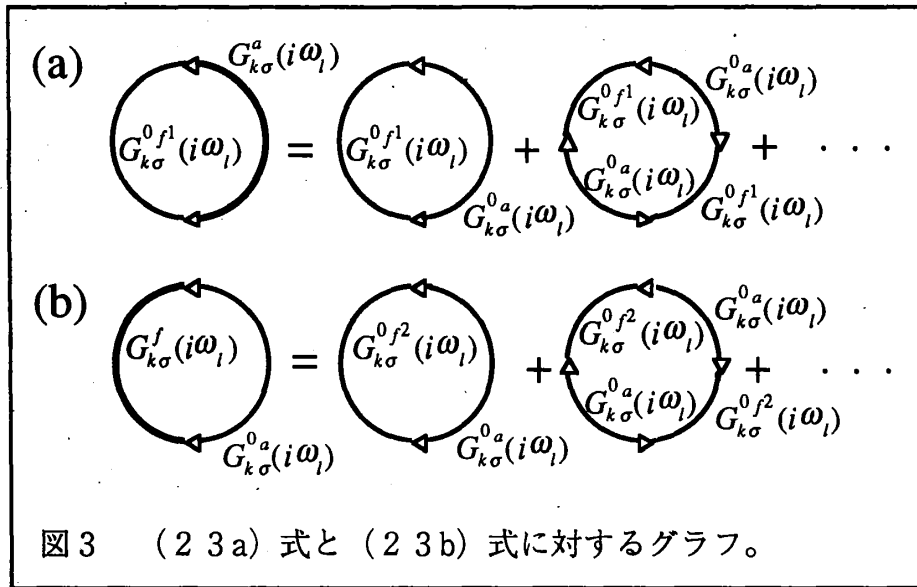
$$= \frac{1}{2\beta} \sum_{k\sigma} \sum_l G_{k\sigma}^a(i\omega_l) \left(\sqrt{\lambda} (-\Delta\mu) + \lambda |V_k|^2 G_{k\sigma}^{0f1}(i\omega_l) \right) \frac{1}{\lambda} \\ + \frac{1}{2\beta} \sum_{k\sigma} \sum_l G_{k\sigma}^f(i\omega_l) \left(\sqrt{\lambda} (-\Delta\mu) + \lambda |V_k|^2 G_{k\sigma}^{0a}(i\omega_l) + \lambda \Pi_{k\sigma}^{(2)}(i\omega_l) \right) \frac{1}{\lambda} \quad . \quad (22b)$$

ここで、(2 2b) 式の第1項の括弧内の2番目と第2項の括弧内の2番目について検討する。前者に 2λ を掛けて $x1$ とする。また、後者に 2λ を掛けて $x2$ としてこれらの表式を以下に書く。

$$x1 = \frac{1}{\beta} \sum_{k\sigma} \sum_l G_{k\sigma}^a(i\omega_l) \lambda |V_k|^2 G_{k\sigma}^{0f1}(i\omega_l) \quad , \quad (2 3 a)$$

$$x2 = \frac{1}{\beta} \sum_{k\sigma} \sum_l G_{k\sigma}^f(i\omega_l) \lambda |V_k|^2 G_{k\sigma}^{0a}(i\omega_l) \quad 。 \quad (2 3 b)$$

(2 3 a) 式と (2 3 b) 式はそれぞれ図3の (a) と (b) のグラフからの熱力学ポテンシャルへの寄与である。この (a) と (b) のそれぞれにおいて、等号の右辺に現れるグラフは、お互いに $G_{k\sigma}^{0f1}(i\omega_l)$ と $G_{k\sigma}^{0f2}(i\omega_l)$ とを置き換えたものになっている。しかし、これらの (a) と (b) のグラフはその構造上同じものを表しているはずである。従って、以後こ



の二つの寄与は同じものであると仮定する。このことは $G_{k\sigma}^{0f1}(i\omega_l)$ と $G_{k\sigma}^{0f2}(i\omega_l)$ とが等しいこと、従ってまた $\Pi_{k\sigma}^{(1)}(i\omega)$ と $\Pi_{k\sigma}^{(2)}(i\omega)$ とが等しいことを意味する。更に、(9) 式の定義が妥当であることが推測できる。

そこで $\Pi_{k\sigma}^{(1)}(i\omega)$ と $\Pi_{k\sigma}^{(2)}(i\omega)$ を $\Pi_{k\sigma}(i\omega)$ と書く。また、 $G_{k\sigma}^{0f1}(i\omega_l)$ と $G_{k\sigma}^{0f2}(i\omega_l)$ を $G_{k\sigma}^{0f}(i\omega_l)$ と書く。この時、(2 3 a) と (2 3 b) とは次のようになる。

$$x1 = x2 = \frac{1}{\beta} \sum_{k\sigma} \sum_l \frac{\lambda |V_k|^2}{T_{k\sigma}(\lambda)} \quad 。 \quad (2 4)$$

ここで、 $T_{k\sigma}(\lambda) = (G_{k\sigma}^{0f}(i\omega_l))^{-1} (G_{k\sigma}^{0a}(i\omega_l))^{-1} - \lambda |V_k|^2$ 。

以上の点を考慮して (2 2b) 式を更に次のように変形することが出来る。

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Omega(\lambda)}{\partial \lambda} = & \frac{1}{2\beta} \sum_{k\sigma} \sum_l \left\{ \sqrt{\lambda} (-\Delta\mu) (G_{k\sigma}^{0f}(i\omega_l))^{-1} + 2\lambda |V_k|^2 + \sqrt{\lambda} (-\Delta\mu) (G_{k\sigma}^{0a}(i\omega_l))^{-1} \right\} \frac{1}{T_{k\sigma}(\lambda)} \frac{1}{\lambda} \\ & + \frac{1}{2\beta} \sum_{k\sigma} \sum_l G_{k\sigma}^f(i\omega_l) \lambda \Pi_{k\sigma}(i\omega_l) \frac{1}{\lambda} \end{aligned} \quad (25)$$

(25) 式の中で、右辺第二項は次のように変形することが出来る。

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\beta} \sum_{k\sigma} \sum_l G_{k\sigma}^f(i\omega_l) \lambda \Pi_{k\sigma}(i\omega_l) \frac{1}{\lambda} &= \frac{\partial X'}{\partial \lambda} - \frac{1}{\beta} \sum_{k\sigma} \sum_l \lambda \Pi_{k\sigma}(i\omega_l) \frac{\partial}{\partial \lambda} G_{k\sigma}^f(i\omega_l) \\ &= \frac{\partial X'}{\partial \lambda} - \frac{1}{\beta} \sum_{k\sigma} \sum_l \frac{\partial}{\partial \lambda} (\lambda \Pi_{k\sigma}(i\omega_l) G_{k\sigma}^f(i\omega_l)) + \frac{1}{\beta} \sum_{k\sigma} \sum_l G_{k\sigma}^f(i\omega_l) \frac{\partial}{\partial \lambda} (\lambda \Pi_{k\sigma}(i\omega_l)) \end{aligned} \quad (26)$$

この式で、 X' については、先ず図1の中の部品[2]とグリーン関数[6]のみから構成されているスケルトングラフの和を考え、次にそれらのスケルトングラフに含まれる全てのグリーン関数[6] (即ち $G_{fk}^0(i\omega)$) を (10b) 式のグリーン関数 $G_{k\sigma}^f(i\omega)$ で置き換えたものである。(26) 式を使って (25) 式を更に次のように書き直す。

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Omega(\lambda)}{\partial \lambda} &= \frac{1}{\beta} \sum_{k\sigma} \sum_l \frac{1}{T_{k\sigma}(\lambda)} \left\{ \frac{1}{2\sqrt{\lambda}} (-\Delta\mu) (G_{k\sigma}^{0f}(i\omega_l))^{-1} + |V_k|^2 + \frac{1}{2\sqrt{\lambda}} (-\Delta\mu) (G_{k\sigma}^{0a}(i\omega_l))^{-1} \right. \\ &\quad \left. + (G_{k\sigma}^{0a}(i\omega_l))^{-1} \frac{\partial}{\partial \lambda} (\lambda \Pi_{k\sigma}(i\omega_l)) \right\} + \frac{\partial X'}{\partial \lambda} - \frac{1}{\beta} \sum_{k\sigma} \sum_l \frac{\partial}{\partial \lambda} (\lambda \Pi_{k\sigma}(i\omega_l) G_{k\sigma}^f(i\omega_l)) \\ &= \frac{1}{\beta} \sum_{k\sigma} \sum_l \frac{-1}{T_{k\sigma}(\lambda)} \frac{\partial}{\partial \lambda} T_{k\sigma}(\lambda) + \frac{\partial X'}{\partial \lambda} - \frac{1}{\beta} \sum_{k\sigma} \sum_l \frac{\partial}{\partial \lambda} (\lambda \Pi_{k\sigma}(i\omega_l) G_{k\sigma}^f(i\omega_l)) \\ &= \frac{-1}{\beta} \sum_{k\sigma} \sum_l \frac{\partial}{\partial \lambda} \ln(T_{k\sigma}(\lambda)) + \frac{\partial X'}{\partial \lambda} - \frac{1}{\beta} \sum_{k\sigma} \sum_l \frac{\partial}{\partial \lambda} (\lambda \Pi_{k\sigma}(i\omega_l) G_{k\sigma}^f(i\omega_l)) \end{aligned} \quad (27)$$

従って (27) 式を λ について 0 から 1 まで積分することによって、全系の熱力学ポテンシャルを次のように表すことが出来る。

$$\begin{aligned} \Omega(1) &= \Omega(0) - \frac{1}{\beta} \sum_{k\sigma} \sum_l \ln \left(\frac{T_{k\sigma}(1)}{T_{k\sigma}(0)} \right) + X' - \frac{1}{\beta} \sum_{k\sigma} \sum_l (\Pi_{k\sigma}(i\omega_l) G_{k\sigma}^f(i\omega_l)) \\ &= X' + \frac{1}{\beta} \sum_{k\sigma} \sum_l \left\{ \ln \left(\frac{1}{T_{k\sigma}(1)} \right) - \Pi_{k\sigma}(i\omega_l) G_{k\sigma}^f(i\omega_l) \right\} \end{aligned} \quad (28)$$

この式では、グリーン関数に含まれる λ は全て 1 に置き換えてあるものとする。また、次の関係式を使っている。

$$\Omega(0) = -\frac{1}{\beta} \sum_{k\sigma} \sum_l \ln(T_{k\sigma}(0)) \quad (29)$$

6 熱容量の表式

熱力学ポテンシャル (28) 式は $\Pi_{k\sigma}(i\omega_l)$ の変化に対して定常的である。即ち次の関係が成り立つ。

$$\frac{\partial \Omega}{\partial \Pi_{k\sigma}(i\omega_l)} = 0 \quad (30)$$

この関係式を使うことにより、電子の総数 N_0 に対する次の関係式を導くことが出来る。

$$N_0 = -\left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu}\right)_{TV} = \frac{1}{\beta} \sum_{k\sigma} \sum_l (G_{k\sigma}^a(i\omega_l) + G_{k\sigma}^f(i\omega_l)) \quad (31)$$

化学ポテンシャルはこの (31) 式から求めることができる。更に、エントロピー S は次の様に求まる。

$$S = -\left(\frac{\partial \Omega}{\partial T}\right)_{\mu V} = -\frac{\Omega}{T} + \frac{1}{T} \frac{1}{\beta} \sum_{k\sigma} \sum_l \{i\omega_l G_{k\sigma}^f(i\omega_l) + i\omega_l G_{k\sigma}^a(i\omega_l)\} \quad (32)$$

この表式の導出過程で $\frac{\partial i\omega_l}{\partial T} = \frac{i\omega_l}{T}$ が成り立つことを使っている。(32) 式を利用すると定積熱容量 C_V は次のようになる。

$$C_V = T \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_V = \frac{\partial \mu}{\partial T} N + \sum_{k\sigma} \frac{\partial}{\partial T} \left\{ \frac{1}{\beta} \sum_l i\omega_l (G_{k\sigma}^f(i\omega_l) + G_{k\sigma}^a(i\omega_l)) \right\} \quad (33)$$

さてここで考えている系がフェルミ流体の仮定を満足しているものとして低温の場合の比熱の表式を (33) 式を利用して求める。先ず熱力学ポテンシャルが $\Pi_{k\sigma}(i\omega_l)$ の変化に対して定常的であることから、これを $T=0K$ での値 $\Pi_{k\sigma}^0(i\omega_l)$ で置き換える。但し、 $i\omega_l$ 依存性はそのまま残す。今 $i\omega_l$ を ζ で置き換えて、 $T_{k\sigma}(1)$ を次のように書く。

$$T_{k\sigma}(1) = (\zeta - s_{k\sigma+}(\zeta))(\zeta - s_{k\sigma-}(\zeta)) \quad (34)$$

$$\text{ここで, } s_{k\sigma\pm}(\zeta) = -\frac{1}{2}(2\mu - \varepsilon_k - E_k - \Pi_{k\sigma}^0(\zeta)) \pm \frac{1}{2}\sqrt{(\varepsilon_k - E_k - \Pi_{k\sigma}^0(\zeta))^2 + 4|V_k|^2} \quad .$$

これらを使うと、(33) 式の右辺第2項の表式を順次次のように変形して行くことができる。

$$\sum_{k\sigma} \frac{\partial}{\partial T} \left\{ \frac{1}{\beta} \sum_l i\omega_l (G_{k\sigma}^f(i\omega_l) + G_{k\sigma}^a(i\omega_l)) \right\} = \sum_{k\sigma} \frac{\partial}{\partial T} \left\{ \frac{1}{\beta} \frac{(-\beta)}{2\pi i} \oint_{\Gamma_1} \zeta (G_{k\sigma}^f(\zeta) + G_{k\sigma}^a(\zeta)) \frac{1}{\exp(\beta\zeta) + 1} d\zeta \right\} ,$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{k\sigma} \frac{\partial}{\partial T} \left\{ \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma_2} \zeta \left(\frac{1}{\zeta - s_{k\sigma+}} + \frac{1}{\zeta - s_{k\sigma-}} \right) \frac{1}{\exp(\beta\zeta) + 1} d\zeta \right\}, \\
&= \sum_{k\sigma} \frac{\partial}{\partial T} \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} F(\zeta) \frac{1}{\exp(\beta\zeta) + 1} d\zeta \right\} \quad . \quad (35a)
\end{aligned}$$

ここで,

$$\begin{aligned}
F(\zeta) &\equiv \frac{1}{2\pi i} \left(\frac{\zeta}{\zeta - s_{k\sigma+}(\zeta) - i0^+} - \frac{\zeta}{\zeta - s_{k\sigma+}(\zeta) + i0^+} + \frac{\zeta}{\zeta - s_{k\sigma-}(\zeta) - i0^+} - \frac{\zeta}{\zeta - s_{k\sigma-}(\zeta) + i0^+} \right), \\
&= \zeta \delta(\zeta - s_{k\sigma+}) + \zeta \delta(\zeta - s_{k\sigma-}) \quad . \quad (35b)
\end{aligned}$$

(35a) 式に現れる複素積分路は図4(次頁)に示した。また(35b)に現れる 0^+ は正の無限小量である。低温の場合を考えているので、(35a)式はいわゆるゾンマーフェルト展開を使うことにより次のようになる。

$$\begin{aligned}
(35a) &= \sum_{k\sigma} \frac{\partial}{\partial T} \int_{-\infty}^{+\infty} \{ \zeta \delta(\zeta - s_{k\sigma+}) + \zeta \delta(\zeta - s_{k\sigma-}) \} \theta(-\zeta) d\zeta \\
&\quad + \sum_{k\sigma} \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \left[\frac{\partial}{\partial \zeta} \{ \zeta \delta(\zeta - s_{k\sigma+}) + \zeta \delta(\zeta - s_{k\sigma-}) \} \right]_{\zeta=0} \right) + \dots \\
&= - \frac{\partial \mu}{\partial T} \sum_{k\sigma} \int_{-\infty}^{+\infty} \{ \delta(\zeta - s_{k\sigma+}) + \delta(\zeta - s_{k\sigma-}) \} \theta(-\zeta) d\zeta \\
&\quad + \frac{\pi^2 k_B^2}{3} T \sum_{k\sigma} \{ \delta(-s_{k\sigma+}(0)) + \delta(-s_{k\sigma-}(0)) \} + \dots \\
&= - \frac{\partial \mu}{\partial T} N + \frac{\pi^2 k_B^2}{3} T \sum_{k\sigma} \{ \delta(-s_{k\sigma+}(0)) + \delta(-s_{k\sigma-}(0)) \} + \dots \quad . \quad (36)
\end{aligned}$$

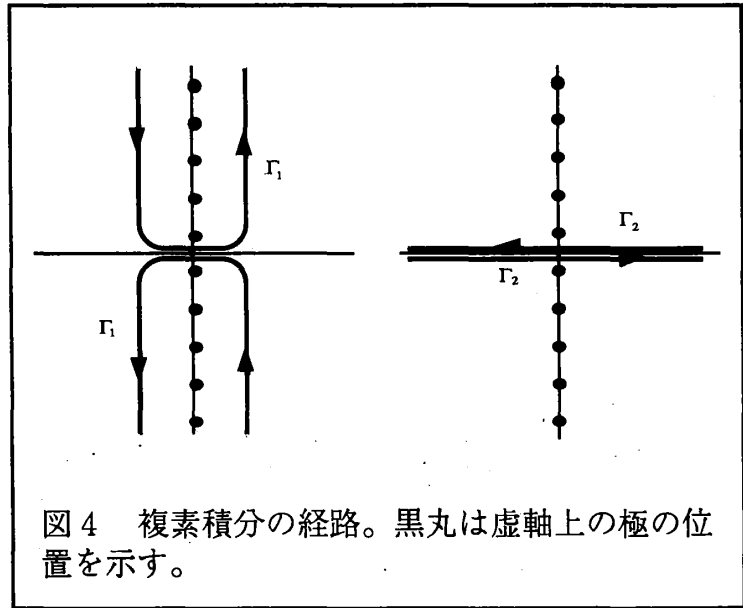
この式を(33)式に代入すると、定積熱容量に対する絶対温度 T の1次迄の次の表式を得る。

$$C_V = \frac{\pi^2 k_B^2}{3} T \sum_{k\sigma} \{ \delta(-s_{k\sigma+}(0)) + \delta(-s_{k\sigma-}(0)) \} \quad . \quad (37)$$

7 まとめと議論

多種類のフェルミ粒子から成る多粒子系の例として、アンダーソンハミルトニアンで記述できる系を取り上げこの系の熱力学ポテンシャルの表式を求めた。電子ガスに対する表式は既にLuttinger et al [2]が導いている。しかし、多種類の粒子が相互作用し

ている系に対しての似た様な便利な表式についてはフェルミ流体であることを仮定した直感的な推測[4]以外には求められていない。小論では電子ガスに対して有効であった我々の相互作用定数の導入方法[3]をこの場合に適用してみた。即ち、通常の扱い方のように単にハミルトニアン H_1 の相互作用部分 H_1 に λ を掛けるのではなく、そこに含まれる全ての生成と消滅



の演算子に $\lambda^{\frac{1}{4}}$ を掛けるのである。その結果、この相互作用定数の導入方法はこの場合にも同様に有効であり、この系の熱力学関数の一般的表式を導くことができた。

この表式を導くにあたり先ずグリーン関数を定義し、次にそれらの運動方程式を導き、通常通り自己エネルギーを定義した。一方(13)式の熱力学関数の表式を相互作用定数で微分する時に、我々の方法で導入した相互作用定数の次数がうまく機能し、

(17)式に見る通り既に定義したそれぞれの系のグリーン関数とその自己エネルギーによって記述できた。しかし、この過程では(8a)式で定義される $\Pi_{k\sigma}^{(1)}(i\omega)$ と(8b)式で定義される $\Pi_{k\sigma}^{(2)}(i\omega)$ とが同じものであることは推測できない。

次に、熱力学ポテンシャルの摂動計算、即ちグラフ計算に基づくその表式の導出を試みた。この過程では、我々の相互作用定数の導入は、(20)式に見る恒等式を利用することに対応している。そして、(17)式と全く同じ(21e)式を得ることが出来た。更に、グラフの構造を考察することにより、図3から(23a)式と(23b)が等しいこと、即ち $\Pi_{k\sigma}^{(1)}(i\omega)$ と $\Pi_{k\sigma}^{(2)}(i\omega)$ とが等しいことを推測することが可能であった。

以上で、形式的に全系の熱力学ポテンシャルはそれを構成する各多粒子系の熱力学ポテンシャルの和になることが示された。これは、小論の目的の一つであった。更に、グラフの構造を考慮することにより、特にフェルミ流体という仮定を使うことなく(28)式に見る通り電子ガスに対してLuttinger et al [2]が導いたと同様の式を導くことが出来た。この表式は、フェルミ流体を仮定したOhkawa[4]による直感的な推測に基づくもの

と一致している。

次に、熱力学関数が $\Pi_{k\sigma}(i\omega)$ に対して定常的であることを利用して、全系のエントロピーの式である (3.2) 式と定積熱容量の式である (3.3) 式を導いた。更に、後者に対しては系がフェルミ流体であるとの仮定の下に式を変形し、低温の熱容量の表式 (3.7) 式を得た。この表式は山田[5]がそう在るべきものとして使っているものである。山田がそこで導いているようにそれらをそれぞれ f 電子と s 電子からの寄与に分離することは (3.3) 式を使うことによって可能である。この場合、ヘビー・フェルミオンであることの要因はグリーン関数のリノーマリゼーション因子内の電子相関による自己エネルギー部分にその原因が求められるべきと考えられる[5]。そのことはまた、小論で導いた (3.7) 式から判断すると、当然のことながら、電子相関に拠る自己エネルギー部分が s 電子と f 電子の 1 電子状態のハイブリダイゼーションの様相を決め上で重要であるとも言い換えられる。

参考文献

- [1] 例えば, A.L.Fetter and J.D.Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems* (McGraw-Hill, 1971)
- [2] J. M. Luttinger and J. C. Ward, *Phys. Rev.*, **118**, 1417(1960).
- [3] M. Ono, *Prog. Theor. Phys.*, **88**, 443(1992).
- [4] F. J. Ohkawa, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **53**, 1389(1984).
- [5] 山田耕作, 岩波講座現代の物理学 第16巻「電子相関」(岩波, 1993), 162-163頁。